ランダム系のクラスター展開 II

（阪大・教養）　植　山　　宏

（11月4日受理）

前稿に続いて，平均のハミルトニアンで書かれる系より出発するクラスター展開の性質を調べる。

§5. 展開パラメーターと摂動展開

§3の結果（15）は次のように書かれる。

$$\widetilde{M}(t) = \exp_{+L} \sum_n \alpha \Big\{ (1-c)\ \exp_+ \left[-ci\int_0^t V_n(t')\,dt' \right] + c\ \exp_+ \left[(1-c)\ i\int_0^t V_n(t')\,dt' \right] - 1 \Big\} \qquad (15')$$

この式は，摂動展開を行うと

$$\widetilde{M}(t) = \exp_{+L} \sum_n \alpha \Big\{ \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c)\ \frac{i^s}{s!} \int_0^t \cdots \int dt_1 \cdots dt_s\ O\left[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s) \right] \qquad (19)$$

となる。こゝに

$$Q_s(c) = c\,(1-c)\left[(1-c)^{s-1} - (-c)^{s-1} \right] \qquad (20)$$

従って，クラスター展開

$$\begin{aligned}\widetilde{M}(t) = 1 &+ \alpha \sum_n \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c)\ \frac{i^s}{s!} \int_0^t \cdots \int dt_1 \cdots dt_s\ O\left[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s) \right] \\ &+ \alpha^2 \sum_{(n,m)} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{s'=1}^{\infty} Q_s(c)\,Q_{s'}(c)\ \frac{i^{s+s'}}{s!\,s'!} \int_0^t \cdots \int dt_1 \cdots dt_{s+s'} \\ &\qquad O\left[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s)\,V_m(t_{s+1}) \cdots V_m(t_{s+s'}) \right] \\ &+ \cdots \end{aligned} \qquad (21)$$

は，展開パラメータを c（1 − c）とする展開である事が分る。

低濃度展開

$$M(t) = \exp_{+L}\ c\sum_n \{ \exp_+ (i \int_0^t V_n(t')\, dt') - 1 \} \tag{6}$$

と比較すれば，平均の不純物ポテンシャルを取入れる再規格化によって，展開パラメーターが c より c （1 − c）に変ったといってよい。

今，キュムラント函数 K(t)[5] を考える。定義によって

$$M(t) = \exp_+ K(t) \tag{22}$$

$$K(t) = \langle \exp_+ (i \int_0^t H_1(t')\, dt' - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_n \langle \exp_+ (i \int_0^t \rho_n V_n(t')\, dt') - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_n \sum_{s=1}^{\infty} p_{-s}(c) \frac{i^s}{s!} \int_0^t \cdots \int dt_1 \cdots dt_s\, O\{V_n(t_1) \cdots V_n(t_s)\} \tag{23}$$

$$p_s(c) \equiv \langle \rho^s \rangle_c \tag{24}$$

（2 2）式の $\exp_+$ を展開する方法

$$M(t) = 1 + K(t) + \frac{1}{21} O\{K(t)^2\} + \cdots \tag{25}$$

が，ダイアグラム法で通常考えられている[2],[4]"低次"のダイアグラムに相当する。この展開では，上の再規格化は（2 3）の s = 1 の項が落ちる以外に影響はなく，Rs (c)の函数形は変らない。

§ 6　自由エネルギー

こゝでは，§ 3 の展開を自由エネルギーの展開へ拡張する。この方法は，単に不純な系の格子振動や電子状態に限らず，異種のスピンを含むスピン系，固体水素等に適用出来るものと期待出来る，非磁気的な不純物を含むスピン系を例にとって書くと，

$$H = \sum_{(ij)} \rho_i \rho_j J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \tag{26}$$

ρi は，1及び0をとる（独立な）ランダム変数と仮定する。（26）を次のように分解する。

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{(ij)} \gamma\, J_{ij}\, \underset{\sim}{S}_i\, \underset{\sim}{S}_j \tag{27}$$

$$H_1 = \sum_{(ij)} (\rho_i \rho_j - \gamma)\, J_{ij}\, \underset{\sim}{S}_i\, \underset{\sim}{S}_j = \sum_{\alpha} \tau_\alpha V_\alpha$$

こゝに $J_{ij}\, \underset{\sim}{S}_i\, \underset{\sim}{S}_j$ を簡単に V_α と書いた。ランダム変数 τ_α が，H_1 にだけ含まれる事が重要である。

系の自由エネルギーは

$$-\beta F = \ell n Z_0 + \ell n \langle \exp_+ (-\int_0^\beta H_1(\lambda) d\lambda) \rangle \tag{28}$$

こゝに

$$Z_0 = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_0}$$

$$\langle \cdots \rangle = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H_0} \cdots / Z_0 \tag{29}$$

（28）の右辺・第二項を Generalized Cumulant expansion Theorem [5] によって書き直す。

$$\langle \exp_+ (-\int_0^\beta H_1(\lambda) d\lambda) \rangle_c$$

$$= \langle \exp_{+L} \sum_\alpha [\exp_+ (-\int_0^\beta d\lambda\, \tau_\alpha V_\alpha(\lambda)) - 1] - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_\alpha \ell n \langle \exp_+ (-\int_0^\beta d\lambda\, \tau_\alpha V_\alpha(\lambda)) \rangle$$

$$+ \sum_{(\alpha\beta)} \ell n \frac{\langle \exp_+ (-\int_0^\beta d\lambda (\tau_\alpha V_\alpha + \tau_\beta V_\beta)) \rangle}{\langle \exp_+ (-\int_0^\beta d\lambda \tau_\alpha V_\alpha) \rangle \langle \exp_+ (-\int_0^\beta d\alpha \tau_\beta V_\beta) \rangle} \tag{30}$$

$$+ \cdots$$

次に，変数 τ_α について平均をとるのだが，この為に，$\rho_\alpha = \tau_\alpha + \gamma = \rho_i \rho_j$ が，0と1という二つの値しか取らない事を利用して＜‥‥＞の外へ出しておく。 結局，

$$-\beta\overline{F}=\ell n\, Z_{\ddot{o}}$$

$$+\sum_{\alpha}\{\overline{\rho_\alpha}\,\ell n<\exp_+[-\int_0^\beta d\lambda\,(1-\gamma)\,V_\alpha]>+(1-\overline{\rho}_\alpha)\,\ell n<\exp_+[+\int d\lambda\gamma\, V_\alpha]>$$

$$+\sum_{(\alpha\beta)}\{\overline{\rho_\alpha\rho_\beta}\;\ell n<\exp_+[-\int d\lambda\,(1-\gamma)\,V_\alpha-\gamma V_\beta]>$$

$$+\overline{\rho_\alpha(1-\rho_\beta)}\,\ell n<\exp_+[-\int d\alpha\,((1-\gamma)\,V_\alpha-\gamma V_\beta)]>$$

$$+\overline{(1-\rho_\alpha)\,\rho_\beta}\;\ell n<\exp_+[-\int d\lambda\,(-\gamma V_\alpha+(1-\gamma)\,V_\beta)]>$$

$$+\overline{(1-\rho_\alpha)\,(1-\rho_\beta)}\,\ell n<e\lambda p_+[+\int d\lambda\,\gamma\,(V_\alpha+V_\beta)]>$$

$$-\overline{\rho_\alpha}\,\ell n<\exp_+[-\int d\lambda\,(1-\gamma)\,V_\alpha]>-(1-\overline{\rho_\alpha})\,\ell n<\exp_+[+\int d\lambda\gamma V_\alpha]>$$

$$-\overline{\rho_\beta}\,\ell n<\exp_+[-\int d\lambda\,(1-\gamma)\,V_\beta]-(1-\overline{\rho_\beta})\,\ell n<\exp_+[+\int d\lambda\gamma V_\beta]>\}$$

$$+\cdots\cdots \qquad (31)$$

この展開は，$\gamma=0$ 又は１つの時，Lifshitz－Stepanova (7) の低濃度展開に還元するが，$\gamma=c^2$ と取る事によって，ハミルトニアンの段階で平均した系より出発するクラスター展開とする。展開パラメーターはやはりc（1－c）と予想され，ほゞすべての濃度領域で最初の数項で十分と予想されるが，詳細及び応用については別の機会に譲りたい。

(7) I. M. Lifshilz and G. I. Stepanova Soiret plys. －JETP 3 (1956), 656. 及びA. Maraduidin " Theorg of Lattice Dynames in Harmonic Approximations " ed by Seitz －Turnbull P. 198.